

# Transport dans les milieux hétérogènes : Détermination des lois macroscopiques

Anthony Beaudoin<sup>1</sup>, Jean Raynald de Dreuzy<sup>2</sup> & Jocelyne Erhel<sup>3</sup>

<sup>1</sup> LMPG - Université du Havre - [anthony.beaudoin@univ-lehavre.fr](mailto:anthony.beaudoin@univ-lehavre.fr)

<sup>2</sup> Géosciences - Université de Rennes 1 - [aupepin@univ-rennes1.fr](mailto:aupepin@univ-rennes1.fr)

<sup>3</sup> IRISA - INRIA de Rennes - [joceylne.erhel@irisa.fr](mailto:joceylne.erhel@irisa.fr)

## Abstract :

*The geological heterogeneity of underground media is responsible for very large variations of hydraulic parameters with the scale. The rules of scaling are only given on very large fields. The effect of the heterogeneity on the transport laws is studied by means of Monte Carlo simulations. Our objective is to solve flow and transport problems for an important number of large porous media with a very good accuracy, leading to linear systems of several millions of unknowns. In order to reach this objective, we use parallel computing allowing to solve flow and transport problems on grids of size is 10 to 100 times higher than in simulations carried out up today.*

## Résumé :

*L'hétérogénéité des formations géologiques induit une très forte variation des paramètres hydrauliques avec l'échelle. Les règles de changement d'échelles sont déterminées uniquement sur de très grands domaines. L'effet de l'hétérogénéité sur les lois de transport est déterminé à l'aide de simulations Monte Carlo. L'enjeu est de résoudre les problèmes de flux et de transport sur un grand nombre de milieux de très grandes tailles avec une très bonne résolution aboutissant à des systèmes linéaires de plusieurs dizaines de millions d'inconnues. Pour aborder cette question, nous utilisons des solutions de calcul parallèle qui permettent de simuler le transport sur des systèmes de taille 10 à 100 fois supérieures aux simulations effectuées jusqu'à maintenant.*

## Key-words :

**macro dispersion, heterogeneous saturated porous media, Monte Carlo simulations**

## 1 Introduction

Les expériences menées dans une large gamme de milieux géologiques ont révélé des caractéristiques communes au transport de solutés tels que l'effet déterminant de l'hétérogénéité géologique, l'augmentation de la dispersion avec l'échelle et la lente convergence vers un régime asymptotique. La détermination de l'effet de l'hétérogénéité est un pré requis à la détermination des lois de transport et à l'établissement des règles de changement d'échelle (de l'échelle de l'observation géologiques à l'échelle de la modélisation hydrologique). Les expériences de terrain étant limitées en taille et en résolution, ce sont les simulations numériques de type Monte-Carlo qui permettent de comprendre et de quantifier ces règles de changement d'échelle. Numériquement, l'enjeu est de résoudre les problèmes de flux et de transport sur un grand nombre de milieux de très grandes tailles avec une très bonne résolution aboutissant à des systèmes linéaires de plusieurs dizaines de millions d'inconnues. Pour aborder cette question, nous utilisons des solutions de calcul parallèle qui permettent de simuler le transport sur des systèmes de taille 10 à 100 fois supérieures aux simulations effectuées jusqu'à maintenant. Ces simulations numériques montrent que l'hétérogénéité de la perméabilité entraîne la chenalisation des écoulements dans des voies de fortes vitesses entourant des zones de faibles vitesses, créant ainsi une très large gamme de temps caractéristiques de transport. La localisation des

écoulements et ses effets sur le transport sont d'autant plus sous-estimés par les méthodes analytiques reposant sur des développements perturbatifs au premier ordre que l'hétérogénéité est importante. Les résultats numériques permettent de déterminer les paramètres de transport macroscopiques et les temps caractéristiques d'établissement d'un régime asymptotique dans les milieux très hétérogènes.

## 2 Simulations Monte Carlo

Les simulations numériques Monte Carlo sont obtenues à partir de la répétition successive de quatre étapes : génération d'un champ aléatoire de perméabilité, évaluation du champ eulérien écoulement, identification de la trajectoire des particules et détermination des moments statistiques (Saladin et al., 1998).

### 2.1 Champ de perméabilité aléatoire

Le milieu poreux est supposé isotrope et caractérisé par une perméabilité aléatoire  $K$  (en m/s) qui suit une distribution logarithmique  $Y = \ln(K)$ , définie par une moyenne  $m_y$  (en m/s) et une fonction de covariance  $C_y$  :

$$C_y(\mathbf{r}) = \sigma_y^2 \exp(-|\mathbf{r}|^2/\lambda_y) \quad (1)$$

$\sigma_y^2$  et  $\lambda_y$  désignent la variance et la longueur de corrélation. La longueur de corrélation  $\lambda_y$  est comprise entre 0.1 m et 100 m (Tompson *et al.* (1998)); et la variance  $\sigma_y^2$  entre 0 et 7 (Neuman *et al.* (1993)).  $\mathbf{r}$  est un vecteur de séparation (en m) entre deux vecteurs positions  $\mathbf{X}$  et  $\mathbf{X}'$ . Le champ de perméabilité est généré avec une simulation spectrale appelée FIM (Fourier Integral Method) (Yao, 2004). La simulation spectrale détermine la transformée de Fourier avec la librairie FFTW (Fast Fourier Transform in the West) (Frigo et al., 2005) qui permet d'évaluer une transformée de Fourier discrète sur un cluster de processeurs.

### 2.2 Champ d'écoulement eulérien

Etant permanent et sans sources ni puits, l'écoulement est décrit en couplant l'équation de conservation de masse avec la loi de Darcy :

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad \text{avec} \quad \mathbf{V} = -K \nabla h \quad (2)$$

$\mathbf{V}$  et  $h$  désignent la vitesse de Darcy (en m/s) et la charge hydraulique (en m). Les équations d'écoulement sont discrétisées sur une grille régulière en utilisant une méthode de volumes finis, permettant de conserver localement la masse et les flux sur les éléments. Dans les deux directions, la maille de la grille est fixée à  $\Delta x = \Delta y = 1$  m. Pour les conditions aux limites, on impose une condition de Neumann  $\partial h / \partial n = 0$  sur les frontières supérieure et inférieure. Sur les autres frontières, on impose deux conditions de Dirichlet  $h = 0$  et  $1$  m. Le système linéaire  $Ax = B$  est caractérisé par une matrice creuse  $A$ , définie positive et symétrique. La solution  $x$  est la charge hydraulique et le second membre  $B$  représente les conditions de Dirichlet. Nous résolvons ce système linéaire avec la librairie HYPRE contenant un algorithme parallèle multigrille V-cycle, appelé SMG (Structure Multi-Grid) (Falgout *et al.* (2005)).

### 2.3 Trajectoire des particulaires

Nous considérons le cas de la migration d'un soluté inerte dans un milieu poreux saturé. Cette migration est gouvernée par l'advection, la diffusion moléculaire et la dispersion cinématique.

Pour simplifier l'étude, les effets de la diffusion moléculaire et de la dispersion cinématique sont négligés dans un premier temps. Le problème de transport est résolu en utilisant une méthode lagrangienne appelée méthode particulaire. Dans cette représentation lagrangienne, le problème de transport est résolu en déterminant la trajectoire de particules :

$$\frac{dX_i}{dt} = U_i \quad (3)$$

$X_i$  est le vecteur position de la particule  $P_i$ . Cette méthode n'introduit pas de diffusion numérique pour une convection pure. Pour l'équation précédente, on utilise un schéma d'Euler explicite d'ordre 1. Le pas de temps  $dt$  (en secondes) est proportionnel au temps convectif, égale à la taille d'une maille divisée par le minimum des vitesses calculées sur une maille. A l'intérieur d'une maille, la vitesse des particules est obtenue par une interpolation linéaire respectant la conservation de la masse (Pollock (1988)). Ce modèle Transport est facilement parallélisable puisque les particules inertes n'interagissent pas entre elles. La difficulté réside dans l'accès à des données distribuées sur les processeurs. Gérant un sous domaine de la grille, chaque processeur calcule la trajectoire de la particule présente dans son sous domaine. Il communique aux processeurs voisins les particules sortantes de son sous domaine par des opérations, send et recv, non bloquantes et assurées par la librairie MPI.

## 2.4 Moments statistiques

Dans le cas d'un soluté inerte, la théorie du transport montre que les moments de la concentration sont déterminés à partir des moments caractérisant la distribution des particules (Dentz *et al.*, 2000). Une forme discrète de ces moments est donnée par :

$$\langle x^k(t) \rangle_j = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} x_i(t)_j^k \quad (4)$$

$N_p$ ,  $j$  et  $i$  sont respectivement le nombre de particules injectées, le numéro de la simulation et le numéro de la particule injectée.  $k$  désigne l'ordre du moment calculé (1 ou 2).  $x_i(t)$  est l'abscisse de la particule  $P_i$ . Les coefficients de dispersion sont calculés en prenant la dérivée temporelle de ces moments :

$$D_L(t) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \frac{d(\langle x^2(t) \rangle_j - \langle x(t) \rangle_j^2)}{dt} \quad (5)$$

$M$  est le nombre de simulations réalisées. Pour obtenir la macro dispersion transversale, il suffit de remplacer  $L$  et  $x$  par  $T$  et  $y$  dans les expressions.

## 3 Macro dispersions

### 3.1 Validation

#### 3.1.1 Ecoulement

Pour tester le champ eulérien d'écoulement, nous avons évalué les fonctions de covariance de la vitesse. Nos résultats numériques sont comparés à ceux de Salandin *et al.* et aux solutions analytiques de Rubin (Rubin, 1990 et Salandin *et al.*, 1998). Ces solutions analytiques proviennent de développements perturbatifs au premier ordre. Nos valeurs numériques sont obtenues à partir de moyennes calculées sur 500 simulations Monte Carlo, réalisées sur une grille de dimensions

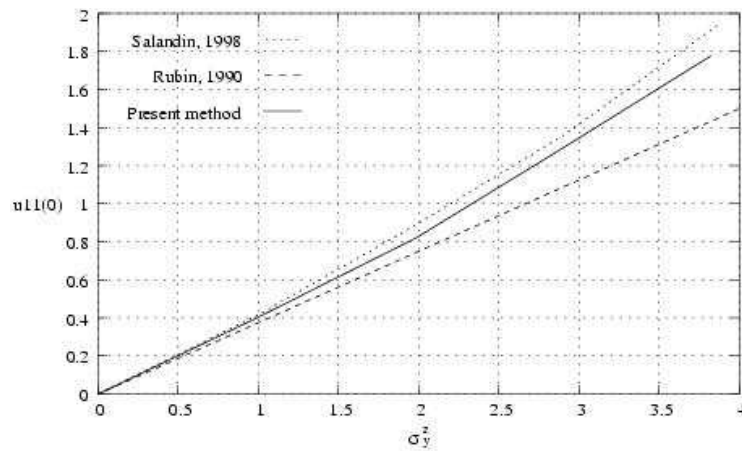


Figure 1: Variance  $U_{11}(0)$  de la composante longitudinale de la vitesse d'écoulement en fonction de la variance  $\sigma_y^2$  de la distribution lognormale  $Y = \ln(K)$ .

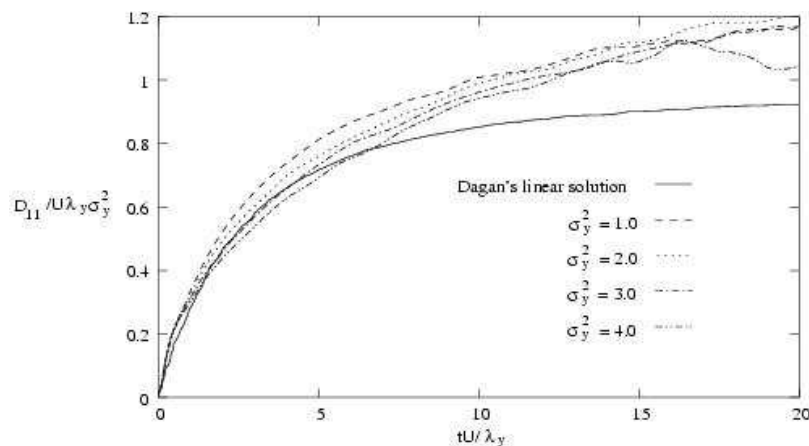


Figure 2: Coefficient adimensionnel de dispersion  $D_L / U \lambda_y \sigma_y^2$  en fonction du temps adimensionnel  $tU / \lambda_y$  pour différentes valeurs de la variance  $\sigma_y^2$ .

512 \* 512. Sur la figure 1, nous avons représenté la variance  $U_{11}(0)$  de la composante longitudinale de la vitesse pour différentes valeurs de  $\sigma_y^2$ . Nous pouvons observer un écart croissant avec  $\sigma_y^2$  entre les valeurs numériques et analytiques. Cet écart s'explique par la suppression des termes non linéaires dans les expressions analytiques des fonctions de covariance de la vitesse. On observe également une légère différence entre nos valeurs numériques et celles de Salandin *et al.*. Cela peut s'expliquer par l'utilisation de schémas de discrétisation différents.

### 3.1.2 Transport

La précision de la méthode particulière est vérifiée en comparant les valeurs numériques et analytiques des coefficients de dispersion  $D_L$  et  $D_T$ . Les valeurs analytiques sont données par les expressions de Dagan (Dagan, 1985). Les valeurs numériques sont obtenues en évaluant la trajectoire de 50 000 particules. Pour chaque simulation Monte Carlo, le nombre de particules injectées est  $N_p = 100$ . Les 500 simulations numériques de Monte Carlo ont été réalisées sur une grille de dimensions 512 \* 512. Sur la figure 2, nous avons représenté la courbe d'évolution

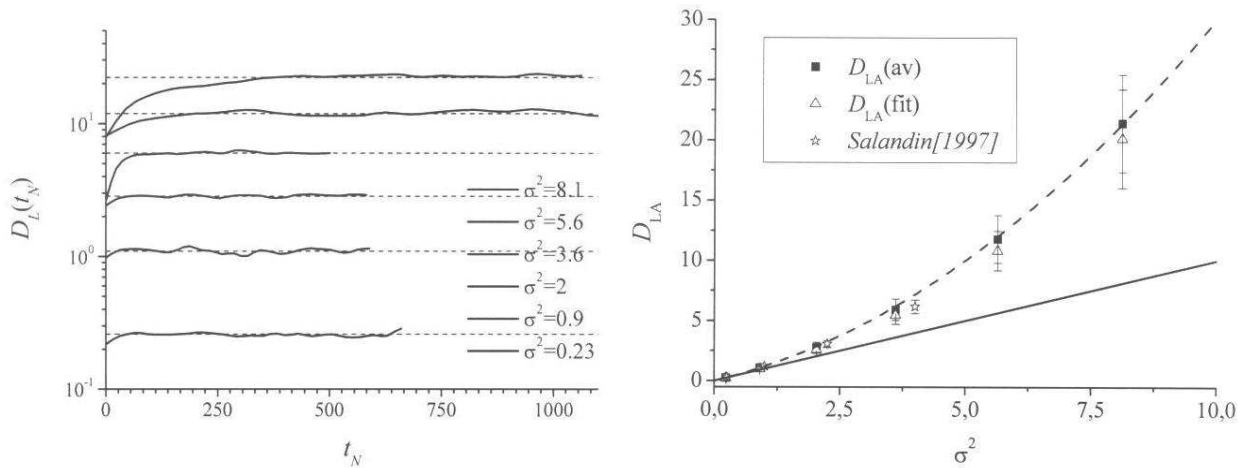


Figure 3: Dispersion longitudinale  $D_L$  en fonction du temps adimensionnel  $t_N = tU/\lambda_y$  (figure de gauche) et en fonction de la variance  $\sigma_y^2$  (figure de droite).

temporelle du coefficient de dispersion  $D_L$  pour différentes valeurs de  $\sigma_y^2$ . Comme pour le champ de vitesse, nous pouvons observer un écart entre les valeurs numériques et analytiques. Cet écart est encore dû à la suppression des termes non linéaires dans les expressions analytiques de Dagan. On observe également que le coefficient de dispersion n'a pas atteint le comportement asymptotique.

### 3.2 Lois de Transport

Sur la figure 3, nous avons représenté la dispersion longitudinale  $D_L$  en fonction du temps adimensionnel  $t_N = tU/\lambda_y$  et en fonction de la variance  $\sigma_y^2$ . Pour observer les régimes asymptotiques de la dispersion longitudinale, nous avons dû injecter 10 000 particules sur des grilles de dimensions  $L_x = 16384$  m et  $L_y = 8192$  m à chaque simulation et réaliser 100 simulations. Sur un cluster SUN de 2 noeuds de 32 machines (2,2 Ghz AMD Opteron bi-processeurs avec 2 Go de RAM), cela a nécessité un temps de calcul de 149 600 secondes soit environ 42 heures.

## 4 Conclusion

L'étude de validation montre que le modèle numérique basé sur une approche de Monte Carlo permet effectivement d'évaluer les coefficients de dispersion pour des milieux très hétérogènes à la différence des méthodes analytiques reposant sur des développements perturbatifs au premier ordre qui sous-estiment ces paramètres de transport. On remarque également qu'il faut réaliser des simulations sur des grilles de grandes tailles pour déterminer les temps caractéristiques d'établissement d'un régime asymptotique. Le développement d'un modèle complètement parallèle a permis de déterminer ces informations. La suite de ce travail est une extension 3D du modèle numérique.

## References

Dagan O. 1985 Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities : the inverse problem *Water Resources Research* **21** 65-72

- Dentz M., Kinzelbach H., Attinger S., Kinzelbach W. 2000 Temporal behaviour of a solute cloud in a heterogeneous porous medium 1 : point-like injection. *Water Resources Research* **36** 3591-3604
- Falgout, R.D., Jones, J.E., Yang U.M. 2005 Pursuing scalability for hypre's conceptual interfaces. *ACM Trans. Math. Softw.* **31** 326-350
- Frigo, M., Johnson, S.G. 2005 The design and implementation of FFTW3. *Proceedings of the IEEE* **93** 216-231
- Neuman, S.P., Orr, S. 1993 Prediction of steady state flow in nonuniform geologic media by conditional moments : exact nonlocal formalism, effective conductivities and weak approximation. *Water Resources Research* **29** 341-364
- Pollock, D.W. 1998 Semianalytical computation of path lines for finite difference models. *Ground Water* **26** 743-750
- Rubin Y. 1990 Stochastic modeling of macro dispersion in heterogeneous porous media *Water Resources Research* **26** 133-141
- Salandin, P., Fiorotto, V. 1998 Solute transport in highly heterogeneous aquifers *Water Resources Research* **39**
- Tompson, A., Falgout, R.D., Smith, S.G., Bosl, W.J., Ashby S.F. 1998 Analysis of subsurface contaminant migration and remediation using high performance computing. *Advances in Water Resources* **22** 203-221
- Yao, T. 2004 Reproduction of the mean, variance and variogram model in spectral simulation. *Mathematical Geology* **36** 487-505